カレントゆらぎ母関数の操作的公式(非平衡系の物理-非平衡ゆらぎと集団挙動-,研究会報告)

根本, 孝裕; 佐々, 真一

カレントゆらぎ母関数の操作的公式

東京大学大学院総合文化研究科　根本孝裕[1], 佐々真一[2]

はじめに

この報告は、研究会における佐々による口頭発表「高次カレントゆらぎ、非線形輸送、変分原理」、根本によるポスター発表「非平衡定常系の流れのまれにおこるゆらぎを実験で測定するための変分公式」に対応する。これらふたつの発表では、最近われわれが見出したカレントゆらぎ母関数の操作的公式 [1] について、その背景や技巧的詳細を論じた。この報告では、文献 [1] とは異なる説明の仕方でその公式を導出することで公式の新たな側面を描くことを目的にする。

平衡統計力学におけるキュムラント母関数

本論に入る前に、熱力学変数のゆらぎ（キュムラント）母関数についての平衡統計力学における議論を復習する。具体的に、N 個のサイトからなる格子上にスピン $\{S_i\}$ が配置された系を考える。この系のハミルトニアン $\mathcal{H}$ は次式で与えられるとする。

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} J_{i,j} S_i S_j - H \sum_{i=1}^{N} S_i. \tag{1}$$

$J_{i,j}$ は隣接サイト対だけに正の一定値をもつとする。H はこの系に加えられた磁場である。このハミルトニアンを用いた逆温度 β のカノニカル分布による平均を $\langle\cdot\rangle_{\beta,H}$ と記す。この系において、1 サイトあたりの平均磁化 $M=\sum_{i=1}^{N} S_i/N$ に対するキュムラント母関数 $G_{\beta,H}(h)$ は

$$G_{\beta,H}(h) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log\langle e^{hMN}\rangle_{\beta,H} \tag{2}$$

で定義される。このとき、

$$G_{\beta,H}(h) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k \frac{h^k}{k!} \tag{3}$$

によって定義される係数 C_k は、磁化 M のゆらぎの k 次キュムラント (=より低次のモーメントによる寄与をのぞいたモーメント。高次になるほど、よりまれに起こるゆらぎの情報を含む。) を $\langle M^k\rangle_{\rm c}$ と置いた時に、$C_k = \lim_{N\to\infty}\langle M^k\rangle_{\rm c} N^{k-1}$ となることが知られている。その一方、$g(\beta,H)$ をこの系のギブス自由エネルギー密度とすると、(2) 式より、

$$G_{\beta,H}(h) = (-\beta)\left\{ g\left(\beta, H+\frac{h}{\beta}\right) - g(\beta,H)\right\} \tag{4}$$

[1]nemoto@jiro.c.u-tokyo.ac.jp
[2]sasa@jiro.c.u-tokyo.ac.jp

が得られる。さらに、$\partial g(\beta, H)/\partial H = \langle M \rangle_{\beta,H}$ より、

$$\frac{\partial G_{\beta,H}(h)}{\partial h} = \langle M \rangle_{\beta,H+h/\beta} \tag{5}$$

が成り立つことが分かる。従って、平衡系の熱力学変数については、その変数のまれに起こるゆらぎを決めるキュムラント母関数を、別の平衡状態におけるその変数の期待値から決めることが出来る。

モデル

1次元リング上のブラウン粒子を考える。その運動方程式はランジュバン方程式

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{1}{\gamma}F(x(t)) + \sqrt{\frac{2T}{\gamma}}\xi(t) \tag{6}$$

で記述されるとする。ここで $x(t) \in [0, L)$ はブラウン粒子の位置を表す確率変数であり、周期境界条件を満たす。$F(x)$ はブラウン粒子に働く力であり、$F(x) = -\partial U/\partial x + f$ として、周期ポテンシャル $U(x)$ による力と均一駆動力 f に分けることが出来る。γ はブラウン粒子の抵抗係数、T は溶媒の温度（$k_B = 1$）、そして $\xi(t)$ は $\langle \xi(t) \rangle = 0$、$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s)$ を満たすホワイトガウシアンノイズである。粒子の時間平均速度 $\bar{V}(t)$ は

$$\bar{V}(t) = \frac{1}{t}\int_0^t ds \frac{dx(s)}{ds} \tag{7}$$

と与えられ、この時間平均速度に対するキュムラント母関数 $G(h)$ は

$$G(h) = \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\log\langle e^{h\tau\bar{V}(\tau)}\rangle \tag{8}$$

と定義される。

最大固有値による表現

$G(h)$ をある演算子の最大固有値と結びつける。$X(t) = t\bar{V}(t)$ で粒子の変位の総和を定義すると、この確率変数 $X(t) \in \mathbf{R}$ は、ランジュバン方程式

$$\frac{dX(t)}{dt} = \frac{1}{\gamma}F(x(t)) + \sqrt{\frac{2T}{\gamma}}\xi \tag{9}$$

に従う。よって、$x(t)$ がある値 x、$X(t)$ がある値 X をとる同時確率密度 $p(x, X, t)$ は、フォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial p(x, X, t)}{\partial t} = \mathcal{L}_{FP}^{(x,X)}[p(x, X, t)] \tag{10}$$

を満たす。ここで、

$$\mathcal{L}_{FP}^{(x,X)}[\cdot] = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{\gamma}\cdot\right) + \frac{T}{\gamma}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cdot\right) - \frac{F(x)}{\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial X}\cdot\right) + \frac{T}{\gamma}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}\cdot\right) + \frac{2T}{\gamma}\left(\frac{\partial^2}{\partial x \partial X}\cdot\right) \tag{11}$$

である。$q_h(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dX e^{hX} p(x,X,t)$ とすると、(10) 式、(11) 式より、$q_h(x,t)$ の時間発展方程式を

$$\frac{\partial q_h(x,t)}{\partial t} = \mathcal{L}_h^{(x)}[q_h(x,t)] \tag{12}$$

として導出出来る。ここで演算子 $\mathcal{L}_h^{(x)}$ の具体的な形は

$$\mathcal{L}_h^{(x)}[\cdot] = -\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{\gamma}\cdot\right) + \frac{T}{\gamma}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cdot\right) + \frac{F(x)}{\gamma}h\cdot + \frac{T}{\gamma}h^2\cdot - \frac{2T}{\gamma}h\left(\frac{\partial}{\partial x}\cdot\right) \tag{13}$$

となる。従って、この演算子 $\mathcal{L}_h^{(x)}$ の最大固有値を λ_h とすれば、十分大きい t に対して、$\langle e^{ht\bar{V}(t)}\rangle = \langle e^{hX(t)}\rangle = \int_0^L dx q_h(x,t) \sim e^{t\lambda_h}$ が成り立つことから、

$$G(h) = \lambda_h \tag{14}$$

が得られる。この結果はよく知られており、例えば、文献 [2] でも上記の方法で導出されている。

固有関数による表現

二乗可積分な周期関数の空間に作用する演算子 $\mathcal{L}_h^{(x)}$ の固有値問題を考える。区間 $[0,L]$ を n 個に分割し、分割幅を Δx とする ($n\Delta x = L$)。微分演算を

$$\frac{\partial f}{\partial x} \to \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x}, \tag{15}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \to \frac{f(x+\Delta x) + f(x-\Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2} \tag{16}$$

と置き換えることで、演算子 $\mathcal{L}_h^{(x)}$ を $n \times n$ 行列 M_n で近似できる。このとき、行列 M_n は、Δx がある値よりも小さいならば、(i) 成分が全て実数、(ii) 非対角成分が非負、及び (iii) 既約となる。従って、ペロン・フロベニウスの定理（例えば、[3] を参照）により、行列 M_n に対して次の条件を満たす固有ベクトル $\boldsymbol{x}_{\rm pf}^{(n)}$ が存在する。

1. $\boldsymbol{x}_{\rm pf}^{(n)}$ の成分は全て正である。
2. $\boldsymbol{x}_{\rm pf}^{(n)}$ に対応する固有値 $\lambda_{\rm pf}^{(n)}$ は実数であり、かつ、縮退がない。
3. $\lambda_{\rm pf}^{(n)}$ 以外の全ての固有値 $\lambda^{(n)}$ に対して、$\lambda_{\rm pf}^{(n)} > {\rm Re}[\lambda^{(n)}]$ (Re は実部) が成立する。

ここで、$n \to \infty$ の極限を考えることで、二乗可積分な周期関数の空間に作用する演算子 $\mathcal{L}_h^{(x)}$ についても、$\lambda_{\rm pf}^{(n)}$ の極限として最大固有値 λ_h が得られ、$\boldsymbol{x}_{\rm pf}^{(n)}$ の極限として正値の固有関数 $\psi_h(x)$ に収束することが期待される。数学的に厳密な議論を行うには、この極限を丁寧に扱う必要があるが、ここでは極限操作の妥当性を仮定して議論をすすめる。

$\mathcal{L}_h^{(x)}$ に共役な演算子 $\mathcal{L}_h^{(x)\dagger}$ は、任意の二乗可積分な周期関数 $f(x), g(x)$ に対して

$$\int_0^L dx (f(x))^* \mathcal{L}_h^{(x)}[g(x)] = \int_0^L dx (\mathcal{L}_h^{(x)\dagger}[f(x)])^* g(x) \tag{17}$$

を満たす演算子として定義される。ここで、$(\cdot)^*$ は $\cdot$ の複素共役をあらわす。具体的には、$\mathcal{L}_h^{(x)\dagger}$ は

$$\mathcal{L}_h^{(x)\dagger}[\cdot] = \frac{F(x)}{\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial x}\cdot\right) + \frac{T}{\gamma}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cdot\right) + \frac{F(x)}{\gamma}h\cdot + \frac{T}{\gamma}h^2\cdot + \frac{2T}{\gamma}h\left(\frac{\partial}{\partial x}\cdot\right) \tag{18}$$

と求められる。$\mathcal{L}_h^{(x)\dagger}$ についても最大固有値は λ_h であり、対応する固有関数 $\phi_h(x)$ は正値である。従って、$\log\phi_h(x) \in \mathbf{R}$ なる量を考えることができる。

このとき、$\phi_h(x)$ についての恒等式

$$\frac{\partial \phi_h(x)}{\partial x} = \phi_h(x)\frac{\partial \log\phi_h(x)}{\partial x} \tag{19}$$

$$\frac{\partial^2 \phi_h(x)}{\partial x^2} = \phi_h(x)\left\{\frac{\partial^2 \log\phi_h(x)}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial \log\phi_h(x)}{\partial x}\right)^2\right\} \tag{20}$$

を用いることにより、固有値方程式

$$\mathcal{L}_h^{(x)\dagger}[\phi_h(x)] = \lambda_h\phi_h(x) \tag{21}$$

を、$\log\phi_h(x)$ に対する式

$$\lambda_h = \frac{F(x)}{\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial x}\log\phi_h(x) + h\right) + \frac{T}{\gamma}\left(\frac{\partial}{\partial x}\log\phi_h(x) + h\right)^2 + \frac{T}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\log\phi_h(x) + h\right) \tag{22}$$

に書き換える。この手法は、Cole-Hopf 変換として知られている。

操作的公式

時間平均速度に対するキュムラント母関数を実験で測定する公式を得るために、平衡統計力学の結果を踏まえて、対象としている系とは別の非平衡定常状態の測定量と、もとの系のキュムラント母関数とを結び付けることを考える。まず、具体的に、別の非平衡定常状態として、もとの系に余分な外場 $w(x)$ を加えた別の系の定常状態を用いる。そして、$F(x)$ の具体的な形を知らなくても、実験によって直接測定することが出来る量でキュムラント母関数を構成するために、(22) 式から、別の定常状態における測定量を用いて

$F(x)$ を消去することを考える。そのために、別の定常状態における確率密度を決定する次式を用いる。

$$\bar{V}^{(w)}L^{-1} = -\frac{T}{\gamma}\frac{\partial\rho^{(w)}(x)}{\partial x} + \frac{\rho^{(w)}(x)}{\gamma}(F(x)+w(x)). \tag{23}$$

ここで $\bar{V}^{(w)}$ は別の定常状態での粒子の平均速度、$\rho^{(w)}(x)$ は別の定常状態での粒子位置の確率密度である。実際に、$\rho^{(w)}(x)$ を (22) 式の両辺にかけて、(23) 式を用いて $F(x)$ を消去し、その式の両辺を x で積分する。その結果と (14) 式を合わせると、

$$G(h) = h\bar{V}^{(w)} + \frac{1}{4T\gamma}\int_0^L dx\rho^w(x)\left\{u_h(x)^2 - 2u_h(x)w(x)\right\} \tag{24}$$

を得る。ただし、

$$u_h(x) = 2T\left(\frac{\partial}{\partial x}\log\phi_h(x) + h\right) \tag{25}$$

と定義した。最後に、(24) 式の両辺を h で微分し、$w(x)$ に $u_h(x)$ を代入すれば、平衡統計力学における (5) 式に対応した

$$\frac{\partial G(h)}{\partial h} = \bar{V}^{(u_h)} \tag{26}$$

を得る。この式は示唆的ではあるが、実験によって $G(h)$ を決定する立場からすれば、$u_h(x)$ の情報が必要になる。実際に実験で $u_h(x)$ を決定するために、(24) 式を利用することが出来る [1]。また、(24) 式において $u_h(x)^2 - 2u_h(x)w(x) = -w(x)^2 + (u_h(x) - w(x))^2$ として、$\rho^{(w)}(x) > 0$ を用いれば、次の変分公式が得られる。

$$G(h) = \max_w\left[h\bar{V}^{(w)} - \frac{1}{4T\gamma}\langle w(x)^2\rangle_w\right]. \tag{27}$$

ここで $\langle\cdot\rangle_w$ は、余分な力 $w(x)$ を加えた別の系の定常状態における平均量である。この変分公式は相加性原理 (additivity principle[4, 5, 6, 7]) と密接に関係している。これらの詳細については文献 [1] を参照されたい。

展望

本報告で用いた手法は、多次元ランジュバン系に拡張することが可能である。また、相互作用のある多粒子系に対して同様の公式を導出することも可能である。ただしその場合には、余分な力が粒子間の相互作用も含んだ力になってしまい、実験で用いる立場からすると直接的に有用な形にはなっていない。しかしながら、この公式を経由することで今まで計算できなかったことが計算され、測定できなかったことが測定できるようになると期待している。

謝辞

演算子の固有値問題に対する、ペロン・フロベニウスの定理の適用に関して議論して頂いた田崎晴明氏に感謝する。

参考文献

[1] T. Nemoto and S.-i. Sasa, arXiv:1009.3379.

[2] J. Mehl, T. Speck, and U. Seifert, Phys. Rev. E **78**, 011123 (2008).

[3] 田崎晴明, 数学 – 物理を学び楽しむために –,
`http://www.gakushuin.ac.jp/~881791/mathbook/index.html`.

[4] T. Bodineau and B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **92**, 180601 (2004).

[5] T. Bodineau and B. Derrida, J. Stat. Phys. **123**, 277 (2006).

[6] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, Phys. Rev. Lett. **94**, 030601 (2005).

[7] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim, J. Stat. Phys. **123**, 237 (2006).